

1,3-フェニレンで架橋した 2,7-二置換アントラセン大環状化合物の合成と構造

(東工大理) ○城 思穂・鶴巻 英治・豊田 真司

Synthesis and structure of 1,3-phenylene bridged 2,7-anthrylene macrocyclic compounds
(School of Science, Tokyo Institute of Technology) ○Kotoho Jo, Eiji Tsurumaki, Shinji Toyota

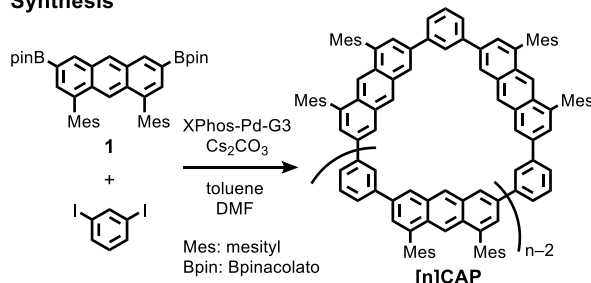
We designed macrocyclic compounds **[n]CAP** consisting of 2,7-anthrylene units and 1,3-phenylene bridges at alternative positions as new cyclic oligoarenes. The target compounds were synthesized by Suzuki-Miyaura coupling of dimesityl substituted 2,7-diborylanthracene **1** and 1,3-diiodobenzene. The separation of the crude products afforded **[3]CAP** and **[4]CAP** both in 8% isolated yields. Single-crystal X-ray diffraction analysis revealed that **[3]CAP** and **[4]CAP** had disk-shaped and saddle-shaped structures, respectively. In the crystal of **[3]CAP**, a solvent chloroform molecule was included in the cavity. In addition, we observed association behavior of **[4]CAP** with fullerenes in toluene by fluorescence titration measurements. Structures and spectroscopic properties of these macrocycles will be reported.

Keywords : macrocyclic compound; oligoarene; anthracene; Suzuki-Miyaura coupling; fluorescence

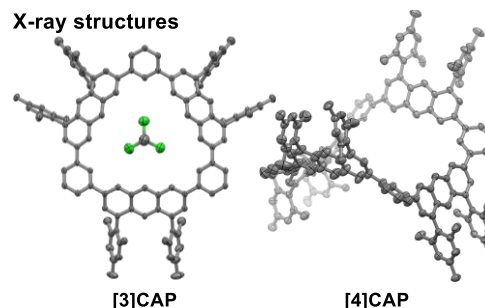
最近我々は、2,7-二置換アントラセンユニットを連結した環状 6 量体が空孔にフラーレン C₆₀ を包接して土星形錯体を形成することを報告した^[1]。この骨格に異なる芳香環を組み込むと、様々な構造を持つオリゴアレーンが設計できる。このような大環状化合物として、1,3-フェニレン架橋を交互に組み込んだ大環状化合物**[n]CAP** を合成し、構造と性質を調べた。

目的化合物は、ジメシチル置換 2,7-ジボリルアントラセン **1** と 1,3-ジヨードベンゼンの Suzuki-Miyaura カップリングにより合成した。粗生成物を分離すると、**[3]CAP** と **[4]CAP** がともに単離収率 8% で得られた。単結晶 X 線構造解析により、**[3]CAP** はディスク形、**[4]CAP** はサドル形の構造をとることが明らかになった。結晶中では **[3]CAP** の空孔に結晶溶媒のクロロホルム 1 分子が包接されていた。また、蛍光スペクトルの滴定測定から、トルエン溶液中で **[4]CAP** がフラーレンと会合挙動を示すことを観測した。合成した大環状化合物の構造および分光学的性質について報告する。

Synthesis



X-ray structures



[1] Y. Yamamoto, E. Tsurumaki, K. Wakamatsu, S. Toyota, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, 57, 8199.